



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

3 / 7

P10-88-94

В.Б.Злоказов

**ЗАДАЧА
ОПТИМАЛЬНОГО ГИСТОГРАММИРОВАНИЯ
СПЕКТРАЛЬНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ**

Направлено в журнал "NIM"

1988

Под гистограммированием понимается сопоставление функции непрерывного аргумента $s(x)$ ее гистограммы - функции дискретного аргумента $s(k)$, которая является представителем функции $s(x)$.

Аргумент k , называемый ячейкой гистограммы, соответствует некоторой подобласти значений непрерывного аргумента x .

Основная задача гистограммирования - это задача оптимального биннинга. Биннинг (bin) - транслитерированный английский термин для обозначения процедуры выбора характеристик ячейки гистограммы.

Прямая задача биннинга состоит в том, чтобы по имеющейся информации /более или менее полной/ о функции $s(x)$ выбрать характеристики ячейки гистограммы, представляющей $s(x)$, оптимальным в том или ином смысле способом.

Данная задача играет большую роль в прикладной математике, но относится к наименее исследованным. Имеется ряд работ по описанию оптимальной ячейки в некоторых частных случаях для функций и плотностей распределения $1/V$, но вопрос о регрессиях остается открытым. Наша работа обязана восполнить этот пробел для очень важного класса регрессий - спектральных распределений ядерной физики.

Наиболее общим толкованием значения ординаты дискретного спектра $s(k)$ в ячейке k будет оцененный с определенной погрешностью интеграл с функции $s(x)$ по области X_k .

Таким образом, когда мы ставим в соответствие функции $s(x)$ ее гистограмму $s(k)$, то последняя представляет первую с погрешностью, в которой мы можем выделить две компоненты, далее называемые погрешностями биннинга 1-го и 2-го рода:

1/ погрешность 1-го рода из-за неточного представления ординатами $s(k)$ интегралов $\int_{X_k} s(x) dx$;

2/ погрешность 2-го рода из-за неточного представления ординатами $s(k)$ значений функции $s(x_k)$.

Пусть задано отображение области X на множество пар $\langle X_k, x_k \rangle$, где X_k - замкнутые интервалы, на которые разбита область X , а x_k - выделенные точки в этих интервалах.

Мы ставим в соответствие совокупности значений функции $\langle s(x) \rangle$, $x \in X$, множество $\langle s(k) \rangle$, где k принадлежит области K , и считаем, что $s(k) \sim s(x_k)$.

Можем записать

$$s(k) = \int_{X_k} s(x) dx + \text{epsk} =$$

$$= \int_{X_k} (s(x_k) + (s(x) - s(x_k))) dx + \text{epsk} = s(x_k) \cdot L_k + \text{delk} + \text{epsk}.$$

Здесь epsk - погрешность биннинга 1-го рода, delk - погрешность биннинга 2-го рода, а L_k - длина ячейки X_k .

Приступим теперь к формальному описанию процедуры оптимального гистограммирования. Предварительно мы должны указать факторы, влияющие на ошибки биннинга delk и epsk . Поскольку $s(k)$ - случайная величина, факторами, определяющими ее погрешность, будут дисперсия и смещение, т.е. разность $\text{MEXP } s(k) - \int s(x) dx$, а также специфически статистический фактор: корреляция между ординатами $s(k)$ и $s(k+j)$, $k = 0, \dots, m$. Факторами, определяющими погрешность delk , будут разбиение X на интервалы X_k и выбор точек x_k в последних.

Рассмотрим детальнее влияние факторов, определяющих погрешность epsk . Мы считаем, что непрерывная линия спектра $f(x)$ есть математическое ожидание случайной величины $s(x)$ - функции аргумента x . Математическое ожидание величины $s(k)$ будет равно, очевидно,

$$M_k = \int_V f(x) dx.$$

С другой стороны, мы можем воспользоваться моделью последовательных двоичных независимых испытаний и считать, что $s(x)$ есть сумма независимых событий, каждое из которых происходит с вероятностью p_k . Если разыгрывалось n событий, то математическое ожидание и дисперсия суммы событий, попавших в X_k , будут равны соответственно

$$n \cdot p_k = M_k \quad n \cdot p_k \cdot (1 - p_k) = M_k - M_k^2/n = D_k.$$

Пусть $P_k(z)$ - функция распределения случайной величины $s(k)$ - ординаты спектра на интервале X_k . На основании неравенства Чебышева для заданной вероятности P_k можно записать

$$\text{ABS}(s(k) - M_k) < \text{SQRT}(D_k/P_k).$$

Это неравенство выполняется с вероятностью $1 - P_k$, и оно определяет стохастическую точность, с которой $s(k)$ равняется n -кратному интегралу от $f(x)$ на X_k . Выражение справа может быть записано как

$$\text{epsk} = \text{SQRT}((M_k - M_k^2/n)/P_k).$$

Если число событий n задано /статистика эксперимента фиксирована/, то при фиксированном $P = P_k$ это выражение является функцией величины M_k . Задачу оптимизации гистограммирования в данном случае можно сформулировать так: построить оператор гистограммирования для функции $f(x)$ и области X такой, чтобы сумма квадратов относительных погрешностей оценок интегралов M_k была минимальной, т.е. чтобы было минимальным выражение

$$\sum_k (\text{epsk}/M_k)^2.$$

Положим число интервалов равным m . Подставив /1/ вместо epsk и убрав постоянную величину P , перепишем оптимизирующий критерий следующим образом:

$$\sum_{k=1}^m (M_k - M_k^2/n)/M_k^2 \quad /2/$$

при условии

$$\sum_{k=1}^m M_k = \text{const}, \quad 0 < M_k.$$

Константа в этом условии равняется интегралу от $f(x)$ по всей области X . Определим оптимальные M_k из условия минимума /2/. Функция Лагранжа имеет вид

$$\sum_{k=1}^m (1/M_k - 1/n) + \lambda \sum_{k=1}^m M_k.$$

Ее стационарная точка удовлетворяет уравнениям

$$1/M_k^2 = \lambda, \quad \sum_{k=1}^m M_k = \text{const}.$$

Отсюда находим $M_1 = M_2 = \dots = M_m$, и, следовательно, $M_k = \text{const}/m$. Матрица вторых производных будет диагональной и положительно определенной и, следовательно, данное решение действительно соответствует минимуму. Таким образом, оптимальную в смысле критерия /2/ гистограмму мы получим, разделив область изменения аргумента X на интервалы равного веса. Суммарное наилучшее квадратичное отклонение будет, очевидно, равно

$$\text{eps} = (1/P) \cdot \sum_{k=1}^m (1/M_k - 1/n) = m \cdot (m/\text{const} - 1/n)/P.$$

Если величина m фиксирована, оптимальная относительная погрешность 1-го рода ϵ_{ps} будет функцией $\text{SQRT}(1/n)$. Если $m = n^a$, то для улучшения относительной погрешности 1-го рода при росте n к ∞ , надо потребовать, чтобы a было строго меньше 0,5; поскольку

$$\epsilon_{ps} = \text{const} \cdot (n^{(2a-1)} - n^{(a-1)}).$$

Очевидно, что данный критерий пока ничего не говорит о выборе узлов ячеек.

Если отказаться от требования сохранения числа ячеек, то результат будет таким: оптимальную в смысле /2/ гистограмму дает разделение области X на минимально допустимое число ячеек равного веса. Это утверждение легко следует из такого соотношения:

$$\text{MIN} \sum_{k=1}^t (1/M_k - 1/n) < \text{MIN} \sum_{k=1}^{t+r} (1/M_k - 1/n) \quad 0 < M_k \leq 1, \quad t, r \geq 1$$

при условиях $\sum_{k=1}^t M_k = 1$ и $\sum_{k=1}^{t+r} M_k = 1$ соответственно, которые получаются после нормировки M_k на const .

Для доказательства этого соотношения заметим, что первый минимум дается решением $M_k = 1/t$, второй - $M_k = 1/(t+r)$. Сравним

$$\sum_{k=1}^t (t-1) = t^2 - t \quad \text{и} \quad \sum_{k=1}^{t+r} (t+r-1) = (t+r)^2 - (t+r)$$

и учитывая, что $t, r \geq 1$, получим наше утверждение.

Вывод: чем шире ячейки, тем гистограмма лучше в смысле критерия /2/.

ПРИМЕР 1. Чистая экспонента.

Пусть $f(x) = a \cdot \exp(-a \cdot t)$, $t \in (0, \infty)$. Пусть $\langle T_k \rangle$, $k = 1, \dots, m$ - оптимальное разбиение оси $(0, \infty)$ на m ячеек равного веса, равного $1/m$. Попытаемся вывести явные формулы для концов этих интервалов. Пусть $t(i-1)$ и $t(i)$ - концы i -го интервала. Интеграл от $f(x)$ на $i+1$ -ом интервале равен

$$\int f(x) dx = \exp(-a \cdot t(i)) - \exp(-a \cdot t(i+1)) = \\ = \exp(-a \cdot t(i)) \cdot (1 - \exp(-a \cdot d(i, i+1))) = 1/m,$$

где

$$d(i, i+1) = t(i+1) - t(i).$$

Имеем

$$\exp(-a \cdot d(i, i+1)) = 1 - \exp(a \cdot t(i))/m,$$

откуда

$$d(i, i+1) = (-1/a) \cdot \ln(1 - \exp(a \cdot t(i))/m), \quad t(0) = 0.$$

Вместе с формулой

$$t(i) = \sum_{k=0}^{i-1} d(k, k+1)$$

это дает рекуррентный алгоритм для вычисления концов интервалов оптимального разбиения.

Последний m -ый интервал будет бесконечным, т.е. $d(m-1, m) = \infty$. Если, как обычно в спектрометрии, $a = \ln(2)/T_{12}$, где T_{12} - период полураспада, то легко вывести явные выражения для $t(i)$ и $d(i, i+1)$:

$$d(0, 1) = T_{12} \cdot \ln(m/(m-1))/\ln(2)$$

$$d(1, 2) = T_{12} \cdot \ln((m-1)/(m-2))/\ln(2)$$

.....

$$d(i, i+1) = T_{12} \cdot \ln((m-i)/(m-i-1))/\ln(2)$$

.....

Перейдем теперь к погрешностям 2-го рода.

Будем предполагать, что оптимальное разбиение области X на интервалы $\langle X_k \rangle$, $k = 1, \dots, m$ уже произведено, и теперь надо выбрать те точки x_k внутри каждого интервала, в которых ордината u_k , равная приблизительно M_k/L_k , будет представлять значение непрерывной функции $s(x_k)$ в оптимальном смысле. Погрешность такого представления будет функцией расстояния $\epsilon(x)$ от u_k на интервале X_k , и задачу оптимизации 2-го рода можно сформулировать, очевидно так: выбрать x_k такое, чтобы расстояние от $s(x)$ до константы $s(x_k)$ на интервале X_k было минимальным.

Зададимся, как и ранее, квадратичной метрикой. Критерием оптимальности 2-го рода можно будет записать так:

$$x_k = \text{ARG MIN}_{x_k} \int (s(x) - s(x_k))^2 dx.$$

Это вариационная задача, которая в классе непрерывных функций $s(x)$ для конечного X_k имеет просто вычисляемое решение. Им будет аргумент

$$s(x_k) = (1/L_k) \cdot \int_{X_k} s(x) dx, \quad /4/$$

т.е. в качестве оптимального в смысле квадратичной метрики узла ячейки следует выбирать точку, в которой $s(x)$ равна своему интегральному среднему на интервале /это будет не обязательно середина интервала, как обычно принято считать для гистограмм/.

Если среди интервалов X_k есть бесконечные, то квадратичная метрика не подходит. Возьмем для определенности метрику C . Нетрудно убедиться, что решением задачи

$$x_k = \text{ARG INF}_{X_k} \text{SUP}_x \text{ABS}(s(x) - s(x_k))$$

будет аргумент

$$s(x_k) = (\text{SUP}_x s(x) - \text{INF}_x s(x))/2, \quad /5/$$

т.е. в качестве оптимального в смысле равномерной метрики узла ячейки следует выбирать аргумент амплитудного среднего значения функции на интервале /тоже в общем случае не совпадающий с его серединой/. В обоих случаях таких аргументов может быть несколько. Выбор одного из них возможен только на основе дополнительных условий задачи, о чем речь пойдет ниже. Заметим сразу, что оптимизация гистограммирования в смысле погрешности 2-го рода заинтересована в общем случае в максимально возможном сужении интервалов.

ПРИМЕР 1. Случай чистой экспоненты /продолжение/.

Определим теперь узлы t_k оптимальных интервалов T_k . Будем полагать, что $a = \ln(2)/T_{12}$. На основании /3/ и /4/ имеем

$$\begin{aligned} & \ln(2) \cdot \exp(-a \cdot t(i-1)) \cdot (1 - \exp(-\ln((m-i+1)/(m-i)))/(T_{12} \cdot \ln((m-i+1)/(m-i))) = \\ & = \ln(2) \cdot \exp(-a \cdot t(i-1))/(m-i+1) \cdot \ln((m-i+1)/(m-i)) \cdot T_{12} = \\ & = \exp(-a \cdot (t(i-1) + h)). \end{aligned}$$

Отсюда находим

$$h = (T_{12}/\ln(2)) \cdot \ln(T_{12} \cdot \ln((m-i+1)/(m-i)) \cdot (m-i+1)/\ln(2)) \quad /6/$$

при $i \neq m$. Для $i = m$, имеем, на основании /5/, $a \cdot \exp(-a \cdot t(m-1))/2 = a \cdot \exp(-a \cdot (t(m-1) + h))$.

Отсюда получаем

$$h = T_{12}. \quad /7/$$

ПРИМЕР 2. Гауссова функция.

Гауссиан

$$s(x) = (1/\text{SQRT}(2 \cdot \pi)) \cdot w \cdot \exp(-(x-p)^2/w^2)$$

является немонотонной функцией; кроме того, первообразная в явном виде от него не берется. Ввиду этого построить явные формулы для вычисления концов m интервалов равного веса не удастся. Здесь можно указать следующий алгоритм. Пусть $m = 2 \cdot k + 1$. Решаем численно или с помощью таблиц уравнение

$$\int_{p-h}^{p+h} s(x) dx = (1/m)$$

относительно h и полагаем $t(1) = p - h$, $t(2) = p + h$; затем процесс решения уравнений

$$\int_{t(i-1)}^{t(i)} s(x) dx = (1/m)$$

$t(i-1)$

продолжаем по обе стороны от точки p и получаем последовательно пары интервалов $\langle t(i-1), t(i) \rangle$, $\langle t(j-1), t(j) \rangle$ и т.д.

Точки $t(i)$, $t(j)$ при $i = j = k$ зададут концы двух бесконечных интервалов. Если $m = 2 \cdot k$, то процесс следует начать, положив $t(1) = p$ и вычисляя пары интервалов $\langle t(i-1), t(i) \rangle$, $\langle t(j-1), t(j) \rangle$ и т.д.

Такой алгоритм переносит на ординаты конечных ячеек гистограммы важное свойство функции - симметрию относительно точки p .

Аналогично численно или с помощью таблиц определяются узлы ячеек. При этом узлы бесконечных ячеек определяются явно

$$h = \text{SQRT}(L^2 + 2 \cdot w^2 \cdot \ln(2)) - q,$$

где q равно одному из $(t(k) - p)$.

Если $m = 2 \cdot k + 1$, то возможных узлов ячейки $\langle t(1), t(2) \rangle$ будет два: слева от p , и справа от p . Если выбрать любой, симметрия гистограммы нарушится. Можно взять в качестве узла их полусумму, т.е. точку p , но и тогда ордината гистограммы

Будет представлять систематически заниженное значение $s(x)$ в точке максимума, т.е. возникнет систематическая ошибка представления.

ПРИМЕР 3. Лоренцева функция.

Примеру 2 аналогичен случай функции $s(x) = 1/(w \cdot 2 \cdot \pi \cdot (1+z^2))$, где $z = (x-p)/w$. Но здесь задача построения интервалов равного веса решается легче, так как первообразная от $s(x)$ существует в явном виде. Например, если $m = 2 \cdot k + 1$, то, применяя вышеизложенный алгоритм, получим

$$\int_{p-h}^{p+h} s(x) dx = (1/2 \cdot \pi) \cdot \arctg(h/w) = 1/m.$$

Отсюда $h = w \cdot \operatorname{tg}(1/m)$. Далее для $i = 2, \dots, m-1$ имеем

$$\int_{t(i-1)}^{t(i)} s(x) dx = (\arctg(t(i)/w) - \arctg(t(i-1)/w))/(2 \cdot \pi) = 1/m.$$

Отсюда последовательно находим

$$t(i) = w \cdot \operatorname{tg}(2 \cdot \pi / m + \arctg(t(i-1)/w)).$$

Аналогично находятся интервалы слева от точки p .

Узлы ячеек $x(k)$ можно найти по формулам

$$x(k) = p + w \cdot \operatorname{SQRT}((t(k) - t(k-1))/(\arctg(t(k)/w) - \arctg(t(k-1)/w)) - 1).$$

Узел бесконечной ячейки можно определить так:

$$x(m) = p + w \cdot \operatorname{SQRT}(2 \cdot (1 + z^2)), \quad z = (t(m-1) - p)/w.$$

Здесь так же, как и в случае гауссовой функции, особо решается вопрос об узле центральной ячейки. Если приоритет отдается минимуму погрешности, то решением будет один из двух асимметричных узлов. Если же приоритет отдается симметрии представления, то узлом будет точка p .

Последние примеры продемонстрировали действие дополнительных условий, предъявляемых к гистограммам, таких, как симметрия и несмещенность в точке максимума. Другими такими условиями могут также быть и несмещенность в точке минимума, сохранение площади /интеграла/ функции и другие.

На практике при измерении спектров описанные методы гистограммирования могут быть применены на основании априорной информации об измеряемой функции $s(x)$ следующим образом:

1/ иногда настройкой измерительной аппаратуры;

2/ чаще при построении интегральных распределений из отдельных событий;

3/ и, наконец, при преобразованиях одних координат спектров к другим.

Оптимальное гистограммирование может существенно повысить качество анализа данных с малой статистикой.

В массовых измерениях многоканальных спектров ячейки имеют, как правило, одинаковую ширину, и здесь задача оптимального гистограммирования является задачей оптимального представления гистограммой функции, заданной интегралами на фиксированных интервалах с фиксированными погрешностями 1-го рода.

В заключение остается рассмотреть еще вопрос о погрешности гистограммирования в тех случаях, когда по техническим причинам или вследствие отсутствия априорной информации ячейки гистограммы и узлы этих ячеек фиксированы. Итак, пусть X_k - k -ая ячейка гистограммы $s(k)$ функции $s(x)$ и x_k - фиксированный узел этой ячейки. Требуется оценить норму разности $s(x_k) - s(k)$. Будем считать, что измерение дает нам приближенное значение интеграла $\int s(x) dx$ по интервалу X_k .

Пусть это будет величина u_k .

С другой стороны, такой же оценкой является величина $s(k) \cdot L$, где L = длина ячейки. Имеем

$$r = s(k) - s(x_k) = (1/L) \cdot \int (s(x) - s(x_k)) dx.$$

Имеем следующую оценку

$$\operatorname{ABS}(r) \leq (1/L) \cdot \int \operatorname{ABS}(s'(x) \cdot (x_k - x)) dx = \operatorname{MAX} \operatorname{ABS}(s'(x)) \cdot L/2 \quad x \in X_k.$$

Это оценка погрешности 2-го рода. Полная погрешность будет включать в себя еще и член 1-го рода.

ПРИМЕР. Рассмотренные ранее функции.

Пусть

$$f(t) = a \cdot \exp(-a \cdot t), \quad f'(t) = -a^2 \cdot \exp(-a \cdot t).$$

Максимум модуля 1-й производной этой функции достигается при $t = 0$ и обратно пропорционален квадрату периода полураспада.

Далее возьмем

$$f(x) = c \cdot \exp(-(x-p)^2/(2 \cdot w^2)),$$

где $c = 1/(\operatorname{SQRT}(2 \cdot \pi) \cdot w)$. Для этой функции максимум модуля 1-й производной достигается в точках

$$x = p \pm w/\operatorname{SQRT}(2).$$

И наконец, $f(x) = c/(1 + (x-p)^2/w^2)$, где $c = 1/(2 \cdot \pi \cdot w)$.

Для этой функции максимум модуля 1-й производной достигается в точках

$$x = p \pm w / \text{SQRT}(3).$$

Качественное заключение изложенного материала можно сформулировать следующим образом.

Математические соображения, лежащие в основе выбора ширины ячеек спектральной гистограммы, отвечают двум противоположным требованиям:

- 1/ сделать размер ячейки достаточно широким для обеспечения хороших статистических свойств будущей гистограммы;
- 2/ сделать размер ячейки по возможности узким для того, чтобы изображаемая гистограммой функция описывалась ею достаточно точно внутри каждой ячейки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ченцов Н.Н. Статистические решающие правила и оптимальные выводы. М.: Наука, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 марта 1988 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1.2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. (2 тома)	7 р. 75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р. 00 к.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р. 80 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
Д3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р. 50 к.
—	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. (2 тома)	13 р. 50 к.
Д1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. (2 тома)	7 р. 35 к.
Д9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. (2 тома)	13 р. 45 к.
Д7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986.	7 р. 10 к.
Д2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа - 86". Дубна, 1986.	4 р. 45 к.
Д4-87-692	Труды Международного совещания по теории малочастичных и кварк-адронных систем. Дубна, 1987.	4 р. 30 к.
Д2-87-798	Труды VIII Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1987.	3 р. 55 к.
Д14-87-799	Труды Международного симпозиума по проблемам взаимодействия мюонов и пионов с веществом. Дубна, 1987.	4 р. 20 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.